Фокин А.А., студент
Смирнов Г.Б., проф., д-р техн. наук

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕПЛОВОГО И ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЕЙ ЭЛЕКТРОЛИЗЕРА

Электролиз – это совокупность процессов, протекающих в растворе или расплаве электролита, при пропускании через него электрического тока. Электролиз является одним из важнейших направлений в электрохимии.

Зачастую в электрохимии проведение натурных экспериментов требует больших средств и времени для достижения поставленной задачи. Взаимосвязь многих процессов, протекающих при электролизе, затрудняет исследования, особенно если сила тока велика, как это часто бывает в промышленных электрохимических установках. Для оптимизации работы электрохимических аппаратов актуальным становится количественный расчет трехмерных распределений полей, при этом поля следует рассматривать во взаимодействии, учитывая особенности конструкции электрохимического аппарата. Таким образом, лучшим решением для оптимизации режимов функционирования электрохимических комплексов и систем становится применение математического моделирования и вычислительный эксперимент.

Основополагающим для моделирования будет являться лапласиан – вероятно, один из самых важных операторов математической физики. Лапласиан функции позволяет оценить значение функции в точке через значение функции в соседних точках. Кроме того, лапласиан можно считать обобщением второй производной функции одной переменной на многомерный случай. Вид оператора Лапласа:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Покажем основное свойство лапласиана, благодаря которому он широко используется. Если:

1) лапласиан функции u положителен в точке (x,y), то $u(x,y)$ меньше среднего значения функции в соседних точках (например, на окружности с центром в точке (x,y));
2) лапласиан функции u равен нулю в точке (x,y), то $u(x,y)$ равна среднему значению функции в соседних точках;
3) лапласиан функции u отрицателен в точке (x,y), то $u(x,y)$ больше среднего значения функции в соседних точках.

Под средним значением функции в соседних точках понимается среднее значение функции либо по окружности, либо по кругу с центром в точке (x,y).

Необходимо также знание о граничных условиях.

Три наиболее важных типа граничных условий: граничное условие первого рода (условие Дирихле); граничное условие второго рода (условие Неймана); граничное условие третьего рода (условие Робена).

Краевая задача с граничными условиями первого рода (задача Дирихле). Требуется найти решение уравнения в некоторой области пространства, которое принимаст на границе области заданные значения. В качестве примера можно привести задачу о нахождении стационарного распределения температуры внутри области, если задана температура на границе этой области. Другой пример: найти распределение потенциала внутри области, если известен потенциал на границе.

Краевая задача с граничным условием второго рода (задача Неймана). Требуется найти решение уравнения в некоторой области пространства, на границе которой задана внешняя нормальная производная $\partial u/\partial n$ (которая пропорциональна втекающему потоку). Это общая задача и для теплопроводности, и для электростатики, если на границе задан поток (электронов, тепла и т.д.).

Задача Неймана (для уравнения Лапласа) имеет смысл только в том случае, когда полный поток через границу равен нулю. Математически это значит, что на границе должно выполняться соотношение:

$$\int_C \frac{\partial u}{\partial n} = 0,$$

иначе задача не будет иметь решения. Еще одна особенность задачи Неймана, которая отличает ее от других граничных задач, это неединственность решения.

Краевая задача с граничным условием третьего рода. Требуется найти такое решение уравнения в некоторой области пространства, которое удовлетворяет на границе условию вида:

$$\frac{\partial u}{\partial n} + h(u - g) = 0,$$

где h – заданная константа, а g – заданная функция, которая, вообще говоря, меняется вдоль границы.

Таким образом, моделирование должно осуществляться с применением знаний о лапласианах, граничных условиях. Необходимо учитывать особенности конструкции электролизера, рассматривать поля во взаимодействии. Прежде чем проводить исследования на какой бы то ни было математической модели, необходимо удостовериться в ее соответствии реальному физическому процессу, правильности учета физических законов, эффективности работы алгоритма ее реализации и качестве анализа полученных данных. Для этого следует просчитать задачу, решение которой уже известно. Таким образом можно показать и оценить эффективность полученной математической модели.